

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $\text{LaFe}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_{3-\delta}$

Расковалов А.А., Киселев Е.А., Черепанов В.А.

Уральский государственный университет, Екатеринбург

Целью настоящей работы являлось исследование термодинамической устойчивости и кристаллической структуры сложнооксидных фаз общего состава $\text{LaFe}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_{3-\delta}$ при 1100°C в интервале парциальных давлений кислорода $10^{-9} - 0.21$ атм.

Образцы состава $\text{LaFe}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_{3-\delta}$ были синтезированы на воздухе по цитратной технологии с конечной температурой отжига 1100°C в течение 5 суток с промежуточными перетираниями в агатовой ступке и закаливании через каждые 24 часа. Фазовый состав полученных образцов определяли рентгенографически на дифрактометре ДРОН-УМ1 (CuK α – излучение) в интервале углов $20^\circ \leq 2\theta \leq 75^\circ$.

Полученные на воздухе образцы $\text{LaFe}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_{3-\delta}$ различного состава (x) отжигали в герметичной закалочной установке при 1100°C и парциальных давлениях кислорода 10^{-3} , 10^{-6} и 10^{-9} атм в течение 2-3-х суток с промежуточными перетираниями. Парциальное давление кислорода в установке регулировали с помощью датчика, выполненного из стабилизированной двуокиси циркония.

По данным РФА устойчивые на воздухе при 1100°C твердые растворы $\text{LaFe}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_{3-\delta}$ ($0.6 \leq x \leq 0.8$, пр.гр. $R\bar{3}c$) оказались неоднородными уже при $p(\text{O}_2) = 10^{-3}$ атм. Наиболее стабильными фазами из ряда составов $\text{LaFe}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_{3-\delta}$ при низких парциальных давлениях кислорода были твердые растворы на основе феррита лантана (пр.гр. $Pbnm$) с областью гомогенности на воздухе $0 \leq x \leq 0.4$. Так, сложный оксид состава $\text{LaFe}_{0.8}\text{Ni}_{0.2}\text{O}_{3-\delta}$ начинал разлагаться на орторомбическую фазу с более высоким содержанием железа $\text{LaFe}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_{3-\delta}$, тетрагональную фазу La_2NiO_4 и металлический никель при $p(\text{O}_2) = 10^{-9}$ атм.

Для всех однофазных образцов методом полнопрофильного анализа Ритвелда были уточнены параметры элементарных ячеек кристаллических решёток и координаты атомов.

Работа выполнена при финансовой поддержке CRDF HOЦ «Перспективные материалы» (проект № ЕК-005-Х1) и РФФИ (проекты № 05-03-32477 и № 04-03-96136 Урал).